

Groene chemie

Leerdoelen

- Je kunt de atoomeconomie bereken bij een gegeven reactievergelijking.
- Je kunt de E-factor berekenen als de reactievergelijking en het rendement bekend zijn.
- Je kunt het rendement van een reactie berekenen.
- Je kunt uitleggen hoe je een proces duurzamer kunt maken door gebruik te maken van de 12 uitgangspunten van de groene chemie.

In binas 37H/ScienceData 1.7.7 en 97F staan de formules van de groene chemie en de 12 uitgangspunten van de groene chemie. In binas 97A/ScienceData 38 staan gegevens over het gevaar van stoffen zoals de grenswaarde, in 97B staan de gevarensymbolen en in 97 E/ScienceData 38.2 de gevarensinnen.

Atoomeconomie = $\frac{\text{massa gewenst product}}{\text{massa beginstoffen}} \times 100 \%$

Bij de atoomeconomie kijk je alleen naar de reactievergelijking en niet hoe goed het in de praktijk lukt.

Rendement = $\frac{\text{werkelijke opbrengst}}{\text{theoretische opbrengst}} \times 100 \%$.

Let er op dat de theoretische en werkelijk opbrengst in dezelfde eenheid staan, bijvoorbeeld gram.

E-factor = $\frac{\text{massa beginstoffen} - \text{werkelijke massa product}}{\text{werkelijke massa product}}$

De E-factor is het aantal gram afval dat ontstaat per gram gewenst product, het is een getal en geen percentage zoals de atoomeconomie en het rendement.

Netto CO₂ uitstoot versterkt het broeikaseffect.

In een verbrandingsmotor kunnen zuurstof en stikstof uit de lucht reageren tot NO_x, wat kan zorgen voor smog en verzuring. Ook zwaveldioxide, dat ontstaat bij de verbranding van brandstoffen met zwavel erin, zorgt voor smog en verzuring. Fosfaationen die terechtkomen in het oppervlaktewater zorgen ervoor dat algen heel hard groeien en de rest van het leven verdringen, dat heet eutrofiëring.

[Uitlegfilmpje](#) groene chemie



[uitleg atoomeconomie E-factor](#)



[uitleg rendement](#)



[voorbeeldexamenopgave](#)



[nog een examenopgave](#)



Opgave 1

Uit ethanol en butaanzuur ontstaat een ester.

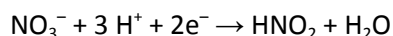
- Geef de reactievergelijking in structuurformules.
- Bereken de atomeconomie. Geef je antwoord in vier significante cijfers.
- Bereken de E-factor als het rendement 75 % is.
- Bereken het rendement als uit 10 mL ethanol ($T=293\text{ K}$) en een overmaat butaanzuur 16 gram van de ester ontstaat.

Opgave 2

Stanyl® is een hittebestendig polymeer dat bij ongeveer 300 °C vloeibaar wordt. Het is een condensatiepolymeer van de monomeren hexaandizuur en butaan-1,4-diamine. Het butaan-1,4-diamine wordt in een aantal stappen bereid. In de laatste stap wordt 1,4-butaandiamine bereid uit waterstof en butaan-1,4-dinitril ($\text{N}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$).

a Bereken het rendement als met $1,3\cdot 10^3\text{ m}^3$ waterstof ($T = 298\text{ K}$, $p = p_0$) 1,0 ton butaan-1,4-diamine geproduceerd wordt uit butaan-1,4-dinitril.

Hexaandizuur kan op meerdere manieren worden bereid. De bereiding van hexaandizuur door cyclohexanol ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}$) te laten reageren met geconcentreerd salpeterzuur noemen we in deze opgave proces 1. De halfreactie van het salpeterzuur is hieronder gegeven.



b Geef de vergelijking van de halfreactie van de omzetting van cyclohexanol tot hexaandizuur.

Gebruik molecuulformules. In de vergelijking van de halfreactie komen ook H_2O en H^+ voor.

c Leid met behulp van beide halfreacties de vergelijking van de totaalreactie voor proces 1 af.

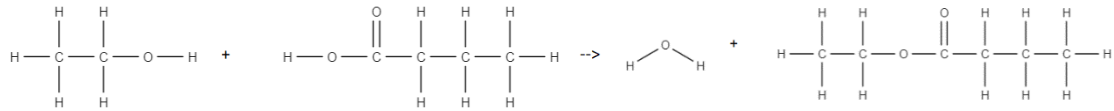
In proces 1 wordt HNO_2 gevormd. Deze stof ontleedt bij de procesomstandigheden tot onder andere NO. De atomeconomie van proces 1 bedraagt 41,49%. Een andere methode om hexaandizuur te maken (proces 2) is de reactie van cyclohexeen met waterstofperoxide (H_2O_2). Cyclohexeen reageert hierbij in een molverhouding van 1 : 4 met waterstofperoxide. Behalve hexaandizuur ontstaat hierbij alleen water.

- Bereken de atomeconomie van proces 2. Geef je antwoord in vier significante cijfers.
- Geef twee argumenten die gebruikt kunnen worden als een keuze tussen proces 1 en 2 moet worden gemaakt. Geef argumenten gebaseerd op informatie uit deze opgave en/of Binas-tabel 97A/ScienceData 38.

Antwoorden

Opgave 1

a.



b. De massa van de ester is $6 \times 12,01 + 12 \times 1,008 + 2 \times 16,00 = 116,156$ u

De massa van de beginstoffen is $2 \times 12,01 + 6 \times 1,008 + 16 + 4 \times 12,01 + 8 \times 1,008 + 2 \times 16,00 = 134,17$ u.

Atomeconomie = $116,156 / 134,17 \times 100 \% = 86,57 \%$.

c. De werkelijke opbrengst is $0,75 \times 116,156 = 87,12$

De massa van de beginstoffen is 134,17 (zie b)

E-factor = $(134,17 - 87,12) / 87,12 = 0,54$

d. $10 \text{ mL} \times 0,80 \text{ g/mL} = 8,0$ gram ethanol

$8,0 / 46,068 = 0,174$ mol ethanol

Uit 1 mol ethanol kan 1 mol ester ontstaan, dus kan er 0,174 mol ester ontstaan.

De molaire massa van de ester is (zie b) 116,156 g/mol.

$0,174 \text{ mol} \times 116,56 \text{ g/mol} = 20,2$ gram ester kan er ontstaan, dat is de theoretische opbrengst.

Rendement is $16 \text{ gram} / 20,2 \text{ gram} \times 100 \% = 79 \%$.

Opgave 2

a $1,3 \cdot 10^6 \text{ dm}^3 / 24,5 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} = 53061 \text{ mol H}_2$

$\text{N} \equiv \text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C} \equiv \text{N} + 4 \text{ H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2$

Dus $53061 / 4 = 13265$ mol butaan-1,4-diamine.

De molaire massa van butaan-1,4-diamine is $4 \times 12,01 + 2 \times 14,01 + 12 \times 1,008 = 88,156$ g/mol.

Er kan $13265 \text{ mol} \times 88,156 \text{ g/mol} = 1,17 \cdot 10^6 \text{ gram} = 1,17 \text{ ton}$ butaan-1,4-diamine ontstaan.

Rendement = $1,0 \text{ ton} / 1,17 \text{ ton} \times 100 \% = 86 \%$

b $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O} + 3 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_4 + 8 \text{ H}^+ + 8 \text{ e}^-$

c. $\text{NO}_3^- + 3 \text{ H}^+ + 2 \text{ e}^- \rightarrow \text{HNO}_2 + \text{H}_2\text{O} \quad (\times 4)$

$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O} + 3 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_4 + 8 \text{ H}^+ + 8 \text{ e}^- \quad (\times 1)$

$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O} + 4 \text{ NO}_3^- + 4 \text{ H}^+ \rightarrow \text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_4 + 4 \text{ HNO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

d



$$6 \times 12,01 + 10 \times 1,008 + 4 \times 16,00$$

$$\text{atoomeconomie} = \frac{\quad}{6 \times 12,01 + 10 \times 1,008 + 4 \times 34,015} \times 100 \% = 66,98 \%$$

$$6 \times 12,01 + 10 \times 1,008 + 4 \times 34,015$$

- e. Voorbeelden van juiste argumenten zijn (twee van de volgende):
- De atoomeconomie van proces 2 is hoger (dus proces 2 verdient de voorkeur).
 - In proces 1 wordt salpeterzuur gebruikt. Dit is een sterk zuur / sterke oxidator. Dit is gevaarlijk bij gebruik (dus proces 2 verdient de voorkeur).
 - In proces 2 wordt waterstofperoxide gebruikt. Dit levert explosiegevaar als het wordt verhit (dus proces 1 verdient de voorkeur).
 - In proces 1 wordt cyclohexeen gebruikt. Cyclohexeen geeft gevaarlijke dampen (dus proces 2 verdient de voorkeur).
 - In proces 1 ontstaat NO. Dit geeft gevaarlijke dampen / reageert heftig met brandbare stoffen (dus proces 2 verdient de voorkeur).
 - In proces 2 ontstaat alleen water (als afval, dus proces 2 verdient de voorkeur).